

PC-SAFT 모델을 이용한 산성가스와 MDEA 수용액계의 기액 상평형 예측

박진아, 신윤수, 빈영욱, 임삼목, 김권일, 박종기*
한국에너지기술연구원
(jngkprk@kier.re.kr*)

가스전에서 나온 천연가스에 포함되어 있는 중요 불순물 중 이산화탄소와 황화수소 성분의 산성가스는 액화과정에서 freezing 문제를 야기 시킬 수 있으며, 파이프라인을 통하여 사용자에게 공급되는 과정에서 수증기와 반응하여 carbonic acid 형태로 존재하여 부식을 발생 시키기 때문에 반드시 사전에 제거해 주어야 한다. 이산화탄소 포집 기술 중 하나인 아민 수용액을 이용한 흡수공정에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 아민수용액의 대표적인 MDEA는 이산화탄소와 직접 반응하지 않으므로, 단순히 압력을 감소시키는 방법에 의하여도 어느정도의 탈거가 가능하며, 가열에 의한 탈거시에도 에너지 요구량이 MEA나 DEA에 비하여 대단히 작다는 장점을 가진다. 이러한 아민 흡수공정 설계를 위하여 산성가스(주로 이산화탄소 및 황화수소)와 아민 수용액 계의 상거동을 해석할 수 있는 모델이 필요하다. 본 연구에서는 통계역학에 기초한 상태방정식인 Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory(PC-SAFT) 모델을 이용하여 산성가스와 MDEA 수용액 계의 상평형 계산, 열적물성(엔탈피) 및 밀도도 예측하였다.